

СТАБИЛЬНОСТЬ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ДИОКСИДЕ ХРОМА

Кашин И.В.^{1*}, Соловьев И.В.^{1,2}, Мазуренко В.В.¹

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²Национальный институт материаловедения, г. Цукуба, Япония

*E-mail: i.v.kashin@urfu.ru

STABILITY OF THE FERROMAGNETISM IN CHROMIUM DIOXIDE

Kashin I.V.^{1*}, Solovyev I.V.^{1,2}, Mazurenko V.V.¹

¹Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan

Annotation. We study the stability of the ferromagnetism in CrO_2 . For this purpose the low-energy t_{2g} model was formed and solved using unrestricted Hartree-Fock and DMFT approaches. Based on values of inter-atomic exchange interactions, being calculated in terms of the theory of infinitesimal spin rotations [2], the spin stiffness constant was evaluated. The results confirm the fact [4] that the dynamical Coulomb interactions tend to destabilize ferromagnetic ground state in CrO_2 .

Диоксид хрома (CrO_2) является редким примером сильно коррелированной физической системы с полуметаллической электронной структурой, в котором ферромагнитное упорядочение магнитных моментов наблюдается в основном состоянии [1]. Целью данной работы является исследование вклада динамических электронных корреляций в формирование магнитных взаимодействий в CrO_2 . Для этого была сформулирована низкоэнергетическая модель t_{2g} зон атомов хрома, которая была численно решена в рамках неограниченного подхода Хартри-Фока (НПХФ) и теории динамического среднего поля (DMFT) методом точной диагонализации. На основе теории бесконечно малого спинового поворота [2] полученная одночастичная функция Грина была использована для расчета величин межатомного обменного взаимодействия, что позволило провести оценку значения константы спиновой жесткости при помощи методических результатов, изложенных в работе [3].

В работе [4], используя найденные величины обменных интегралов, был получен спектр дисперсии спиновых волн. Наличие отрицательных значений частот для случая DMFT свидетельствует о том, что при рассмотрении минимальной модели t_{2g} зон динамические электронные корреляции приводят к дестабилизации ферромагнитного основного состояния.

Известно, что константа спиновой жесткости D является одной из ключевых величин, характеризующих коллективные магнитные возбуждения, возникающих при малых углах отклонения магнитных моментов от ферромагнитного упорядочения. Ярчайшим примером таковых служат рассматриваемые в данной работе спиновые волны. Поэтому, исходя из нестабильности ферромагнетизма,

возникающей при использовании метода DMFT, следует ожидать отрицательных значений D , когда как результаты расчетов НПХФ, демонстрирующие стабильное ферромагнитное решение, должны привести к положительному значению D .

В работе [3] было показано, что величина константы спиновой жесткости может быть оценена по следующей формуле:

$$D = \sum_{\alpha} \sum_j J_{0j} \cdot (R_{0j}^{\alpha})^2, \quad (1)$$

где индекс j обозначает номер соседнего атома Cr к некоторому фиксированному атому, R_{0j}^{α} - α -компонента соответствующего радиус-вектора, J_{0j} - величина обменного интеграла. Применение (1) приводит к следующей оценке D : -46 мэВ (DMFT), 43 мэВ (НПХФ). Характер полученных величин полностью соответствует ожидаемому. Проведенный расчет подкрепляет сделанный в работе [4] вывод о том, что учет динамических электронных корреляций играет очень важную роль в корректном описании магнитных свойств таких сильно коррелированных систем, как CrO_2 .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-32-00076.

1. Skomski R., Simple Models of Magnetism, Oxford University Press (2008)
2. Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I., Phys. Rev. B, **61**, 8906 (2000)
3. J. Phys. F: Met. Phys., **14**, L125 - L128 (1984)
4. Solovyev I.V., Kashin I.V., Mazurenko V.V., Phys. Rev. B, **92**, 144407 (2015)

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ Gd_xNbSe_2

Симонов М.Н.^{*}, Плещев В.Г.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mihail.jaxak.simonov@gmail.com

ELECTRIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF Gd_xNbSe_2

Simonov M.N.^{*}, Pleschov V.G.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The layered Gd_xNbSe_2 compounds with the Gd content from $x=0.1$ up to $x=0.33$ are synthesized by the direct intercalation of Gd into NbSe_2 matrix. The measurements of the dc magnetic susceptibility and magnetization in steady and pulsed magnetic fields have revealed an paramagnetic behavior of Gd_xNbSe_2 . The effective magnetic moment per Gd ion in Gd_xNbSe_2 is observed to be close to μ_{eff} for the free Gd^{3+} ion.